



Karta przedmiotu

Nazwa i kod przedmiotu	Spektroskopia, PG_00038884						
Kierunek studiów	Chemia						
Data rozpoczęcia studiów	luty 2021 r.	Rok akademicki realizacji przedmiotu			2020/2021		
Poziom kształcenia	II stopnia	Grupa zajęć			Grupa zajęć obowiązkowych z zakresu kierunku studiów Grupa zajęć powiązanych z prowadzonymi badaniami naukowymi w dziedzinie nauki związanej z kierunkiem - profil ogólnoakademicki		
Forma studiów	stacjonarne	Sposób realizacji			na uczelni		
Rok studiów	1	Język wykładowy			polski		
Semestr studiów	1	Liczba punktów ECTS			4.0		
Profil kształcenia	ogólnoakademicki	Forma zaliczenia			egzamin		
Jednostka prowadząca	Wydział Chemiczny -> Katedra Chemii Fizycznej						
Imię i nazwisko wykładowcy (wykładowców)	Odpowiedzialny za przedmiot		dr hab. inż. Maciej Śmiechowski				
	Prowadzący zajęcia z przedmiotu						
Formy zajęć i metody nauczania	Forma zajęć	Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt	Seminarium	RAZEM
	Liczba godzin zajęć	30.0	0.0	30.0	0.0	0.0	60
	W tym liczba godzin zajęć na odległość: 0.0						
Aktywność studenta i liczba godzin pracy	Aktywność studenta	Udział w zajęciach dydaktycznych, objętych planem studiów		Udział w konsultacjach	Praca własna studenta		RAZEM
	Liczba godzin pracy studenta	60		10.0	30.0		100
Cel przedmiotu	Celem przedmiotu jest zaznajomienie studentów z podstawami teoretycznymi wybranych działów spektroskopii molekularnej oraz praktycznym zastosowaniem analizy widmowej i obliczeń kwantowochemicznych w fizykochemii molekularnej.						

Efekty uczenia się przedmiotu	<p>Efekt kierunkowy</p> <p>[K7_U04] potrafi dokonać analizy sposobu funkcjonowania urządzeń, aparatury i linii technologicznych stosowanych w laboratoriach i przemyśle chemiczny, potrafi rozpoznać oraz zaproponować metody rozwiązania zadań projektowych, w tym nietypowych, uwzględniając ich aspekty pozatechniczne potrafi wybrać i wykorzystać rutynowe metody, aparaturę chemiczną i narzędzia do rozwiązania zadania projektowego – w tym naukowego.</p>	<p>Efekt z przedmiotu</p> <p>Student dokonuje pomiarów widm molekularnych technikami NMR, IR i UV-VIS, oblicza takie widma molekularne metodami kwantowochemicznymi oraz poprawnie interpretuje uzyskane wyniki w kontekście struktury cząsteczkowej badanych związków.</p>	<p>Sposób weryfikacji i oceny efektu</p> <p>[SU4] Ocena umiejętności korzystania z metod i narzędzi [SU1] Ocena realizacji zadania</p>
	<p>[K7_W05] ma poszerzoną i pogłębioną wiedzę w zakresie fizyki, obejmującą zjawiska z zakresu mechaniki kwantowej, fizyki ciała stałego i fizyki jądrowej, niezbędną do przewidzenia przebiegu zjawisk fizycznych i do rozwiązania rozmaitych problemów technicznych w tym pracy z taki urządzeniami jak mikroskopy elektronowe.</p>	<p>Student wykorzystuje wiedzę zdobytą na kursach fizyki i chemii teoretycznej i kwantowej do interpretacji procesów zachodzących w cząsteczce pod wpływem absorpcji lub emisji promieniowania elektromagnetycznego.</p>	<p>[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej</p>
	<p>[K7_W04] ma specjalistyczną wiedzę dotyczącą wybranych działów spektroskopii molekularnej oraz technik nanoskopowych, aspektów chemii bionieorganicznej, chemii kwantowej</p>	<p>Student posiada wiedzę na temat podstaw teoretycznych wybranych działów spektroskopii molekularnej (IR, NMR, UV/VIS).</p>	<p>[SW1] Ocena wiedzy faktograficznej</p>
	<p>[K7_K01] rozumie potrzebę uczenia się przez całe życie, potrafi inspirować i organizować proces uczenia się innych osób</p>	<p>Student współpracuje z innymi członkami zespołu wykonującego doświadczenie, dokonuje podziału zadań pomiędzy członków zespołu, a następnie (wykorzystując wspólnie uzyskane wyniki eksperymentu) sporządza indywidualne sprawozdanie z wykonanego doświadczenia.</p>	<p>[SK1] Ocena umiejętności pracy w grupie [SK3] Ocena umiejętności organizacji pracy</p>
Treści przedmiotu	<p>Podstawy metod spektroskopowych: światło jako fala elektromagnetyczna, oddziaływanie światła z materią: absorpcja, emisja, rozpraszanie, prawa absorpcji promieniowania, widma absorpcyjne i emisyjne. Spektroskopia rotacyjna: cząsteczki dwuatomowe (model rotatora sztywnego i niesztywnego), cząsteczki wieloatomowe, techniki pomiarowe i zastosowania. Spektroskopia oscylacyjna: oscylator harmoniczny i anharmoniczny, drgania normalne i charakterystyczne, struktura rotacyjna, efekty izotopowe, reguły wyboru, efekt Ramana, aparatura do rejestracji widm oscylacyjnych, rejestracja widma metodą transformacji Fouriera, widma próbek gazowych, ciekłych i stałych, zastosowania spektroskopii oscylacyjnej: analiza jakościowa, wyznaczanie struktury cząsteczek, badanie oddziaływań międzycząsteczkowych. Spektrofotometria: stany elektronowe cząsteczek (podstawowe i wzbudzone), klasyfikacja przejść elektronowych, reguły wyboru, struktura rotacyjno-oscylicyjna, chromofory, widma emisyjne: fluorescencja, fosforescencja, diagram Jabłońskiego, reakcje fotochemiczne, fotodysocjacja, pomiar widm elektronowych absorpcyjnych i emisyjnych, zastosowania: analiza jakościowa i ilościowa, badanie oddziaływań międzycząsteczkowych. Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego: pojęcie spinu jądrowego, opis kwantowy zjawiska, struktura widma, przesunięcie chemiczne, ekranowanie, sprzężenie spinowo-spinowe, relaksacja poprzeczna i podłużna, aparatura pomiarowa, zastosowanie widm 1H, zastosowanie widm innych wybranych jąder. Spektroskopia elektronowego rezonansu paramagnetycznego: podstawy teoretyczne i opis kwantowy zjawiska, rodzaje cząsteczek wykazujących widmo EPR, sposoby rejestracji widma, struktura subtelną i nadsubtelną, zastosowania.</p>		
Wymagania wstępne i dodatkowe	Matematyka I, Fizyka I, Chemia fizyczna, Chemia teoretyczna I		
Sposoby i kryteria oceniania osiągniętych efektów uczenia się	<p>Sposób oceniania (składowe)</p> <p>Sprawozdania z zajęć praktycznych</p>	<p>Próg zaliczeniowy</p> <p>50.0%</p>	<p>Składowa oceny końcowej</p> <p>50.0%</p>
	<p>Egzamin końcowy z materiału wykładów</p>	<p>50.0%</p>	<p>50.0%</p>
Zalecana lista lektur	Podstawowa lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> Z. Kęcki, Podstawy spektroskopii molekularnej, PWN, Warszawa 1998. J. Sadlej, Spektroskopia molekularna, WNT, Warszawa 2002. W. Kotos, J. Sadlej, Atom i cząsteczka, WNT, Warszawa 2007. H. Haken, H.C. Wolf, Fizyka molekularna z elementami chemii kwantowej, PWN, Warszawa 1998. 	

	Uzupełniająca lista lektur	<ol style="list-style-type: none"> 1. Biofizyka. Wybrane zagadnienia wraz z ćwiczeniami, PWN, Warszawa 2008. 2. Fotochemia i spektroskopia optyczna. Ćwiczenia laboratoryjne, PWN, Warszawa 2009. 3. A. Kaczmarek-Kędziera, M. Ziegler-Borowska, D. Kędziera, Chemia obliczeniowa w laboratorium organicznym, Wyd. Naukowe UMK, Toruń 2014.
	Adresy eZasobów	
Przykładowe zagadnienia/ przykładowe pytania/ realizowane zadania	<p>Prawa absorpcji Bougera-Lamberta i Lamberta-Beera, prawo addytywności absorpcji.</p> <p>Przybliżone zakresy energetyczne podstawowych metod spektroskopowych.</p> <p>Mechanizm Einsteina: absorpcja wymuszona, emisja wymuszona, emisja spontaniczna.</p> <p>Separacja elektronowego równania Schrödingera. Przybliżenie adiabatyczne i Born-Oppenheimera. Separacja translacyjnych, rotacyjnych i oscylacyjnych stopni swobody.</p> <p>Model rotatora sztywnego. Poziomy energetyczne rotatora sztywnego, stała rotacyjna, term rotacyjny.</p> <p>Wpływ stanu oscylacyjnego cząsteczki na widma rotacyjne.</p> <p>Podstawowe informacje o widmach rotatorów wieloatomowych.</p> <p>Poziomy energetyczne kwantowego oscylatora harmonicznego, energia zerowa oscylacji.</p> <p>Energia oscylatora anharmonicznego, zmiana reguł wyboru. Anharmoniczność mechaniczna i elektryczna.</p> <p>Reguły wyboru w spektroskopii rotacyjno-oscyłacyjnej.</p> <p>Pasma stokesowskie i antystokesowskie, intensywność pasm ramanowskich.</p> <p>Pomiary stopnia depolaryzacji i ich zastosowanie.</p> <p>Metodyka spektroskopii Ramana.</p> <p>Reguła Francka-Condon, przejścia elektronowe prostopadłe i adiabatyczne.</p> <p>Chromofory.</p> <p>Widma metali przejściowych, kompleksy wysoko- i niskospinowe.</p> <p>Widma emisyjne: fluorescencja, fosforescencja.</p> <p>Czynnik jądrowy i moment magnetyczny jądra.</p> <p>Przemiatanie polem i częstością w pomiarach NMR.</p> <p>Wektor magnetyzacji, relaksacja podłużna i poprzeczna.</p>	
Praktyki zawodowe w ramach przedmiotu	Nie dotyczy	